

Optimasi struktur material adsorben karbon nanostruktur sebagai media penyimpanan hidrogen : studi termodinamika molekuler = Optimizing structure of nanostructured carbon adsorbent material as hydrogen storage medium molecular thermodynamics study

Ihsan Ahmad Zulkarnain, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20390275&lokasi=lokal>

Abstrak

Potensi gas hidrogen untuk diimplementasikan sebagai pembawa energi tanpa emisi sangat menjanjikan. Namun ada beberapa kendala yang harus dihadapi dalam pengimplementasiannya, yakni pengembangan teknologi penyimpanan gas hidrogen. Penyimpanan gas hidrogen dalam suatu adsorben karbon nanostruktur seperti carbon nanotube menjadi salah satu pilihan untuk dapat meningkatkan kapasitas penyimpanannya. Namun, banyaknya penelitian eksperimen yang tidak memberikan hasil yang reproducible menyebabkan perlunya ada pengembangan penelitian teoritis adsorpsi gas hidrogen dengan pendekatan termodinamika molekuler.

Dengan kalkulasi struktur elektronik ab initio, energi potensial interaksi antar molekul gas hidrogen diestimasi sebesar 0,099 kcal/mol dan antara gas hidrogen dengan carbon nanotube diestimasi sebesar 1,057 - 1,142 kcal/mol. Energi potensial tersebut direpresentasikan ke dalam persamaan nilai parameter potensial klasik sebagai fungsi dari diameter carbon nanotube agar didapatkan model potensial yang paling presisi. Setelah mendapatkan nilai-nilai parameter potensial interaksinya, simulasi dinamika molekuler dilakukan dengan ensemble canonical untuk menganalisa adsorpsi gas hidrogen pada permukaan luar carbon nanotube.

Dari hasil pengolahan data simulasi dinamika molekuler, didapatkan bahwa kalor isosterik berkurang dari 1,6 kcal/mol hingga menjadi 0,2 kcal/mol pada kondisi permukaan adsorben jenuh. Hasil ini cukup sesuai dengan hasil penelitian eksperimental literatur lainnya.

.....The potency of hydrogen gas to be implemented as energy carrier with zero emission is very promising. Unfortunately, there are still crucial problems on its implementation, one of them is the development of hydrogen storage technology. Storing hydrogen gas on nanostructured carbon adsorbent could be an alternative to improve the storage capacity. However, the fact that there were so many experimental researches that couldn't provide reproducible results creates a need to develop theoretical research on hydrogen gas adsorption on carbon nanotube using molecular thermodynamics approach.

Using ab initio electronic structure calculations, The interaction potential energies between hydrogen molecules were estimated to be 0.099 kcal/mol and between hydrogen molecule and the outer surface of carbon nanotube were estimated to be 1.057 - 1.142 kcal/mol. The potential energies then were represented into an equation of potential parameter as a function of carbon nanotube diameter in order to get the most precise interaction potential model. Molecular dynamics simulations were performed on canonical ensemble to analyze hydrogen gas adsorption on outer surface of carbon nanotube.

From our calculations results, the isosteric heat of hydrogen physical adsorption on carbon nanotube were estimated to be 1.6 kcal/mol and decreased to 0.2 kcal/mol on saturated surface condition. This results are acceptable with some previous experimental researches results.